

## Molécules polyatomiques

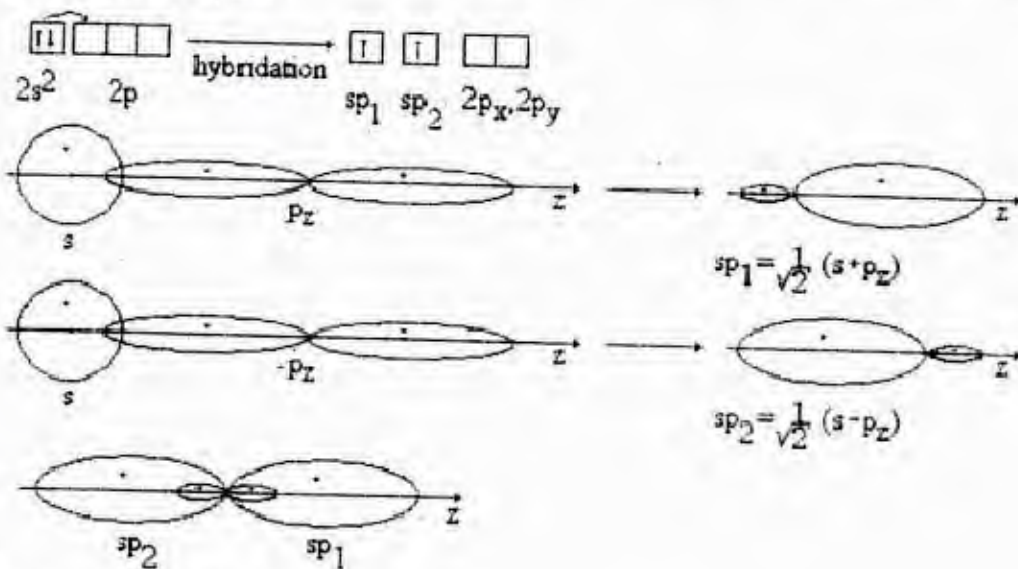
### Géométrie des molécules

#### I- Théorie de l'hybridation

Dans certains cas la théorie des OM ne permet pas d'expliquer des observations expérimentales tel que la géométrie des molécules ou les valeurs des angles de liaisons. Pour cela on a introduit la théorie de l'hybridation pour mettre en accord la géométrie moléculaire avec la méthode CLOA-OM. Cette théorie consiste à transformer les OA de l'atome central en OA hybrides, qui auront la même symétrie que cette molécule. L'OA hybride d'un atome est la combinaison linéaire de ses OA.

#### I- 1- hybridation $sp$ (digonale)

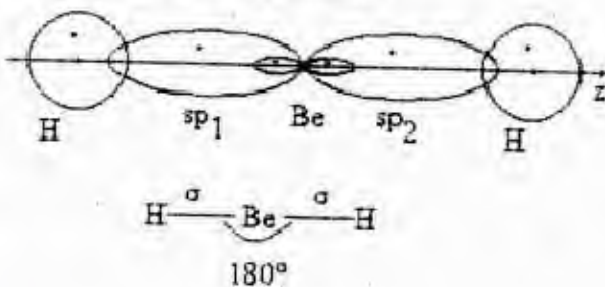
Les OA d'un atome de la 2<sup>ème</sup> période sont :  $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ . A partir des 2 OA  $s$  et  $p_z$  on obtient 2 OA hybrides linéaires  $sp_1$  et  $sp_2$ . Les OA  $2p_x$  et  $2p_y$  restent inchangées et gardent leurs caractères purs.



Exemple :  $BeH_2, C_2H_2, HCN, \dots$

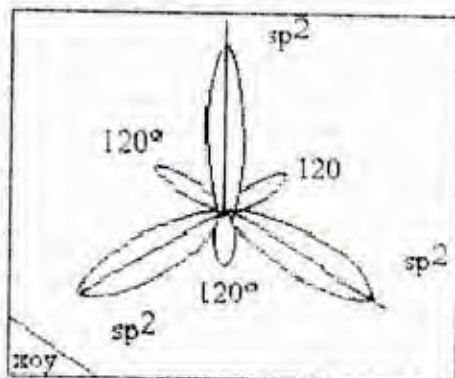
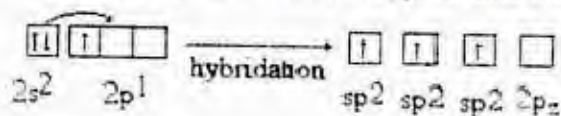
$BeH_2$ :

$Be(z=4) : 1s^2 2s^2 2p^0$ ; hybridation  $sp$ , les 2 OA hybrides se recouvrent avec l'OA  $1s$  de H pour donner une molécule linéaire :



### I- 2- hybridation $sp^2$ (trigonale)

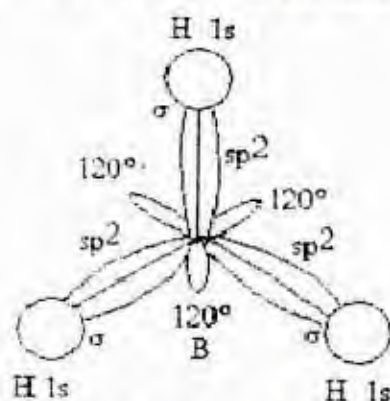
Cette hybridation conduit à des molécules trigonales planes, dans lesquelles l'atome central est lié à 3 atomes dirigés vers les sommets d'un triangle équilatéral. Il faut donc 3 OA hybrides coplanaires, faisant entre elles un angle de  $120^\circ$ , pour se recouvrir avec des atomes voisins. L'OA hybride  $sp^2$  est la combinaison linéaire de 2 OA  $2p_x$  et  $2p_y$  avec une OA  $1s$  :  $(sp^2)_i = a_i 1s + b_i 2p_x + c_i 2p_y$ . Il reste alors une OA  $p_z$  pur.



Exemple :  $BH_3$ ,  $BF_3$ ,  $BCl_3$ ,  $C_2H_4$ ,...

$BH_3$  :

$B(z=5) : 1s^2 2s^2 2p^1$  ; hybridation  $sp^2$ , le recouvrement des 3 OA hybrides du B avec l'OA  $1s$  des 3 H conduit à une molécule plane :



### I- 3- hybridation $sp^3$ (tetraédrique ou tétragonale)

Elle conduit à des molécules à symétrie tétraédrique. Elle consiste à adapter les OA de valence des atomes à la géométrie et à la symétrie de ces molécules, c'est à dire au tétraèdre.

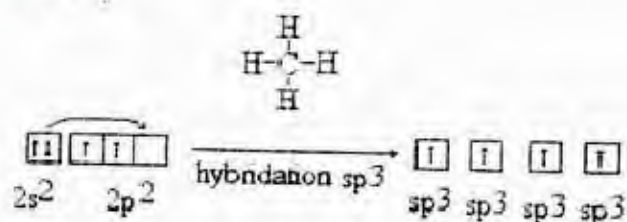
Les OA hybrides  $sp^3$  sont obtenues par la combinaison linéaire des 4 OA  $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$ ,  $2p_z$ . Elles pointent vers les sommets d'un tétraèdre, faisant entre elles des angles de  $109,28^\circ$ .

Exemple :  $CH_4$ ,  $SiH_4$ ,  $NH_3$ ,  $H_2O$ ,...

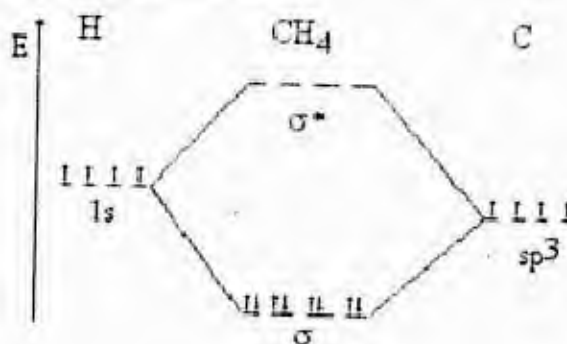
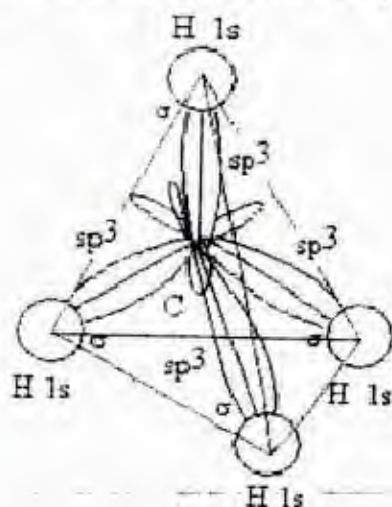


CH<sub>4</sub> (le méthane) :

L'angle de liaison dans cette molécule ne peut pas être expliqué par le diagramme de Lewis. En envisageant l'hybridation  $sp^3$  pour l'atome de carbone, l'accord avec l'expérience devient acceptable.

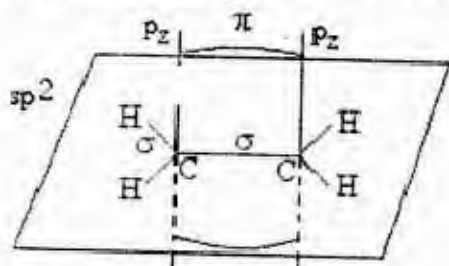


Un recouvrement axial s'établit entre une OA hybride et une OA 1s de l'hydrogène, donnant 4 liaisons  $\sigma$  identiques. La répulsion entre ces liaisons est minimale.

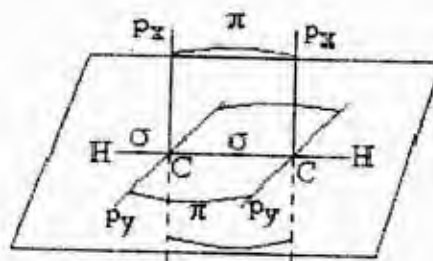


#### I- 4- Hybridation et liaison multiples

L'hybridation  $sp$  donne lieu à une liaison triple, la liaison double est obtenue à partir de  $sp^2$ .  $sp^3$  ne donne que des liaisons simples.



liaison double : C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>

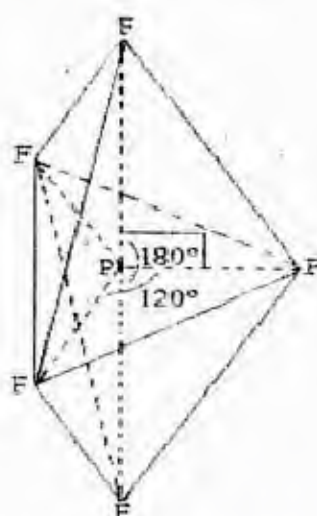
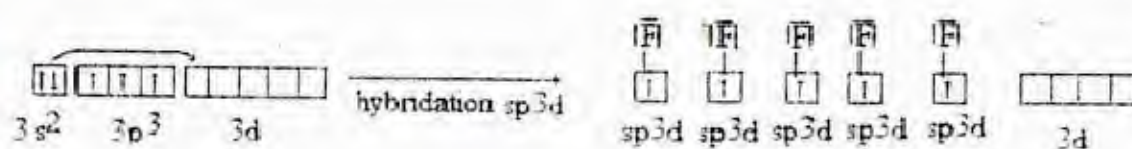


liaison triple : C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>

#### I-5- Autres type d'hybridation

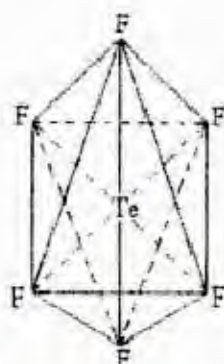
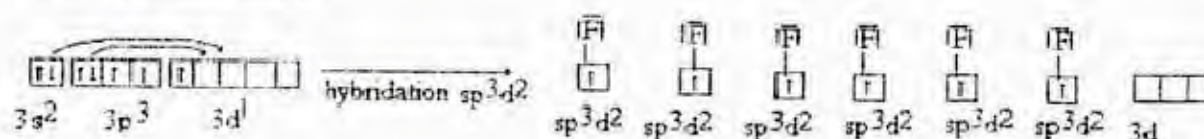
Ce type d'hybridation, tel que  $sp^3d$ ,  $sp^3d^2$ , ..., faisant intervenir les OA d, permet d'expliquer l'existence de certaines molécules.

PF<sub>5</sub> : hybridation  $sp^3d$ .



bipyramide à base triangulaire

$TeF_6$  : hybridation  $sp^3d^2$ .



Octaèdre (bipyramide à base carrée)

## II- Géométrie moléculaire

La structure géométrique d'une molécule dépend essentiellement des forces de liaisons covalentes agissant entre ses atomes. Ces atomes s'arrangent dans l'espace de manière à réduire au maximum possible les répulsions électrostatiques entre les électrons des atomes non liés de cette molécule et entre ceux du même atome. La géométrie adoptée par de nombreuses molécules peut être prévue et expliquée par la théorie de Gillespie, fondées sur le





ETUSUP.com

Programmmation  
**Cours**  
Electricité  
Physique  
Résumés  
Analyse  
Livres  
**Exercices**  
Contrôles Continus  
Langues  
Thermodynamique  
Multimedia  
**Divers**  
Economie  
Travaux Dirigés  
Chimie Organique  
Informatique  
Optique  
Chimie  
Diapo  
Algèbre  
Corrigés  
Mathématiques  
Mécanique  
Travaux Pratiques  
Droit

et encore plus..